

Prodotti software per la fluidodinamica al CILEA

P.L. Miglioli

CILEA, Segrate

Abstract

In questo articolo viene presentata una breve rassegna dei prodotti software per la fluidodinamica numerica disponibili al CILEA, e le indicazioni di base per il loro utilizzo.

Il CILEA mantiene, sulle piattaforme del Consorzio, le versioni aggiornate di vari codici di calcolo specializzati nel campo delle applicazioni in termofluidodinamica computazionale.

Nell'intento di favorire la diffusione degli strumenti informatici più moderni nel campo della CFD (Computational Fluid Dynamics) il CILEA fornisce all'utenza interessata, sia di provenienza accademica che industriale, un'ampia scelta di codici di calcolo, per ciò che riguarda le tecniche di discretizzazione dei domini computazionali e di soluzione delle equazioni che descrivono matematicamente la fisica dei fenomeni in questione. Sono attualmente disponibili i seguenti solutori:

FIDAP, agli elementi finiti, è in grado di trattare problemi in due e tre dimensioni, in regime laminare o turbolento, incomprimibile o comprimibile fino a numero di Mach=0.3.

SPECTRUM, solutore di tipo multiphysics, agli elementi finiti, in grado di risolvere problemi di simulazione nel campo dell'interazione fluidi-strutture, mediante una formulazione di tipo ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian).

FLOW 3-D, ai volumi finiti, utilizza griglie di calcolo strutturate multiblocco.

È cura del CILEA tenere aggiornate le versioni del software installato, in particolar modo per quei prodotti che prevedono lo sviluppo della versione parallela; inoltre viene fornita

assistenza agli utenti su ciascuno dei prodotti installati, sia su richiesta specifica, sia tramite l'organizzazione di corsi di aggiornamento, presentazioni, workshop, ecc.

PRODOTTI DISPONIBILI

1. FIDAP

FIDAP è un package applicativo per la simulazione di diverse classi di problemi nel campo della termofluidodinamica. Sono possibili simulazioni in stato stazionario o transiente, utilizzando geometrie anche molto complesse, bidimensionali, assialsimmetriche e tridimensionali includendo gli effetti della temperatura e la presenza di più specie chimiche.

Il metodo di soluzione delle equazioni differenziali che descrivono matematicamente la fisica dei fenomeni in questione, è quello degli elementi finiti (FEM), una tecnica di largo impiego nel campo dell'analisi strutturale ma di recente applicazione nel campo della CFD.

Con i metodi FEM il dominio di calcolo viene suddiviso in un certo numero di regioni più piccole, chiamate 'elementi finiti', nelle quali le equazioni differenziali alle derivate parziali che descrivono la meccanica dei fluidi vengono sostituite, in ciascun elemento, da equazioni differenziali ordinarie o equazioni algebriche.

Il sistema di equazioni derivante viene risolto con sofisticate tecniche di calcolo numerico per determinare il valore delle grandezze fisiche

coinvolte, pressione, componenti di velocità, temperatura, ecc., in ogni elemento finito e, quindi, in tutto il dominio.

Il grande vantaggio di tali metodi di discretizzazione del dominio di calcolo consiste nella notevole facilità di descrizione di regioni geometricamente anche molto complesse, e la relativa semplicità nella definizione di ogni tipo di condizione al contorno, anche sui confini curvi del campo.

Infine il metodo degli elementi finiti applicato alla fluidodinamica computazionale permette di utilizzare strumenti software molto sofisticati sia per il preprocessing che per il postprocessing, già da tempo sviluppati e disponibili nel campo dell'analisi strutturale.

FIDAP, oltre a permettere l'utilizzo di prodotti CAD già consolidati, come PATRAN, IGES, SUPERTAB, ANSYS, I-DEAS, ICEM-CFD, dispone di un potente strumento per la generazione delle griglie di calcolo, FI-GEN, di un tool per la definizione delle condizioni al contorno, FI-BC e di un modulo per la definizione di tutte le caratteristiche del problema, FIPREP, oltre ad un completo tool di visualizzazione dei risultati, FIPOST. Tutti questi moduli sono utilizzabili sia in modalità interattiva, attraverso interfacce grafiche, GUI, sia in modalità batch.

Classi di problemi modellizzabili

FIDAP permette la simulazione del moto di fluidi viscosi in regime incomprimibile e comprimibile. In condizioni isothermiche le equazioni risolte dal programma sono quelle di Navier-Stokes e l'equazione di continuità; in condizioni non-isothermiche viene aggiunta un'equazione per l'energia, per il calcolo della distribuzione di temperatura nel dominio. FIDAP può risolvere anche fino a quindici equazioni di trasporto addizionali contemporaneamente alle equazioni di Navier-Stokes e dell'energia. Altre classi di problemi sono:

- Flussi mono e bifase (rappresentazione lagrangiana della fase dispersa)
- Flussi con trasporto di massa
- Flussi newtoniani, non newtoniani o viscoelastici
- Regime transiente o stazionario
- Problemi di convezione forzata
- Problemi di convezione libera guidata dal galleggiamento (modelli di Boussinesq)

- Flussi guidati da forze esterne (gravità, Coriolis, elettromagnetiche, centrifughe)
- Flussi periodici
- Flussi con swirl
- flussi in sistemi di riferimento rotanti o traslanti
- Superfici libere in tre dimensioni
- Riempimento di stampi, fusione, solidificazione
- Trasporto di massa dovuto a reazioni chimiche sia omogenee che eterogenee
- Radiazione da corpo grigio, inclusi i calcoli dei fattori di vista

Libreria di elementi 2-D:

- Quadrilateri lineari a 4 nodi
- Quadrilateri quadratici a 8 o 9 nodi
- Triangoli lineari a 3 nodi
- Triangoli quadratici a 6 o 7 nodi

Libreria di elementi 3-D:

- Brick lineari a 8 nodi
- Brick quadratici a 27 nodi
- Tetraedri lineari a 4 nodi
- Tetraedri quadratici a 10 nodi
- Prismi triangolari lineari a 6 nodi
- Prismi triangolari quadratici a 18 nodi

Modelli di materiali:

- Isotropici e ortotropici
- Newtoniani o non newtoniani
- Viscoelastici
- Mezzi porosi saturi: legge di Darcy con le estensioni di Brinkman e Forchheimer
- Dipendenza dal tempo e dalla temperatura per tutte le proprietà dei materiali
- Proprietà dei materiali definibili dall'utente
- Flussi in regime comprimibile ed incomprimibile; Navier-Stokes, Euler e Stokes
- Flussi in regime subsonico, transonico

Leggi di stato dei fluidi:

- Gas perfetto
- Gas ideale

Modelli di viscosità:

- Newtoniano, costante
- Newtoniano, dipendente dalla temperatura
- Newtoniano, dipendente dalle specie chimiche

- Non newtoniano, Bingham
- Non newtoniano, generalized power law
- Non newtoniano, Carreau
- Non newtoniano, definito dall'utente

Modelli di turbolenza:

- K-epsilon
- Prandtl mixing lenght
- RNG K-epsilon
- Low Reynolds K-omega (Wilcox)
- K-epsilon anisotropico
- Modello di viscosità parassita anisotropica (Speziale, Launder)
- Modelli di reazione/combustione turbolenta:
 - Eddy Dissipation
 - Algebraic-eddy-Break-Up
 - Transport-eddy-Break-Up

Algoritmi numerici

Solutori delle equazioni non lineari

- Sostituzioni successive
- Newton-Raphson
- Modified Newton
- Quasi-Newton
- Metodi segregati

Solutori delle equazioni lineari

- Metodo di Gauss diretto
- Solutori iterativi basati sul metodo del gradiente coniugato:
 - GMRES
 - CGS
 - CR
 - CG

Integrazione nel tempo

- Backward Euler (metodo implicito)
- Trapezoid rule (metodo implicito)
- Forward Euler (metodo esplicito)

Tecnologia del software

FIDAP è un prodotto altamente modulare, che permette, cioè, frequenti modifiche o aggiunte di funzioni senza eccessivo sforzo.

Di fatto le nuove versioni del programma vengono rilasciate a scadenza annuale.

Tutti i moduli del prodotto sono utilizzabili tramite GUI in ambiente OSF/Motif X Window standard.

Modalità di utilizzo

FIDAP è disponibile al CILEA sulla macchina parallela Exemplar SPP1200.

Per poter utilizzare il prodotto occorre configurare il proprio ambiente di lavoro in maniera opportuna; bisogna cioè inserire nel path definito nel file di configurazione SHOME/.cshrc quanto segue:

```
set path = (/usr/lib /mcae/fidap7.52/bin $path)
setenv FIDAPROOT /mcae/fidap7.52
```

2. SPECTRUM

"Multiphysics solver" agli elementi finiti, specializzato nella soluzione di problemi di interazione tra fluidi e strutture; può generare griglie di calcolo autoadattive, mediante l'utilizzo di una metodologia di tipo ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian).

Spectrum è basato su un concetto destinato, nel tempo, a rivoluzionare l'ambiente della simulazione al calcolatore di problemi ingegneristici: Full Spectrum Physics™. Con un unico prodotto diventa possibile simulare un vastissimo campo di fenomeni fisici in contesti in cui essi interagiscono determinando il funzionamento di un determinato dispositivo o apparato. Nel caso di Spectrum bisognerebbe quindi parlare di Meccanica Computazionale più che di Fluidodinamica Numerica, includendo nel termine anche l'ambito classico della meccanica dei fluidi e dell'analisi strutturale.

Classi di problemi modellizzabili

Libreria di elementi 3-D:

- Truss
- Beam
- Shell
- Solid

- Grandi e piccole flessioni
- Grandi e piccole deformazioni

Modelli di materiali:

- Elastici lineari
- Isotropici e ortotropici
- Viscoelastici e viscoplastici
- Iperelastici

- Elastici/plastici
- Dipendenza dal tempo e dalla temperatura per tutte le proprietà dei materiali
- Modelli 'Soil CAP'
- Modelli Lemaitre-Chaboche
- Proprietà dei materiali user-defined

Flussi in regime comprimibile ed incompressibile; Navier-Stokes, Euler e Stokes
Flussi in regime subsonico, transonico, supersonico e ipersonico

Leggi di stato dei fluidi:

- Gas perfetto
- Gas ideale
- Fluidi divarianti

Modelli di viscosità:

- Costante
- Bingham
- Sutherland
- Carreau
- Power-law
- User-defined

Chimica dell'equilibrio tra specie multiple
Trasporto scalare

Modelli di turbolenza:

- K-epsilon
- Spalart-Allmaras

Analisi dello stato stazionario

Analisi delle frequenze naturali e di buckling:

- Algoritmo di Lanczos
- Subspace iteration

Analisi transiente

Algoritmo di avanzamento nel tempo HHT (Hilber-Huges-Taylor)

Strategie di time stepping locale e globale

Multiphysics

Spectrum è in grado di simulare l'interazione tra diversi domini fisici in un'unica fase di calcolo

Cinematica d'interfaccia:

- Mesh accoppiate
- Contatto e separazione tra superfici singole o multiple in 3-D
- Scivolamento tra superfici singole o multiple con o senza frizione

Interazione tra regioni:

- Griglie di calcolo di tipo Arbitrary Lagrangian Eulerian (ALE mesh)
- Free Surfaces
- Simulazione di tutti i tipi di fenomeno fisico in ciascuna delle regioni a contatto

Algoritmi numerici

Linear equation solvers

- Simmetrici e non simmetrici
- Metodi diretti
- Solutori a profilo
- Solutori sparsi
- Metodi iterativi
- Drivers:
 - Gradiente Coniugato
 - GMRES (Generalized Minimal Residual)
- Strutture di dati:
 - Elemento per elemento
 - Sparse
- Precondizionatori:
 - Block diagonal
 - Elemento per elemento

Integrazione nel tempo e solutori non lineari

- Impliciti
- Espliciti
- Misti Impliciti/Espliciti
- Augmented Lagrangian
- Line Search
- Newton
- Quasi-Newton (BFGS)

Tecnologia del software

Spectrum è scritto in C standard ANSI, con routines Fortran utilizzate laddove si sia verificato un effettivo miglioramento delle prestazioni; è stato sviluppato per ambienti Unix sia su workstation che su mainframe o

architetture a parallelismo massivo. In particolare la versione parallela, attualmente in fase di test presso il CILEA, è stata realizzata in ambiente PVM 3, e garantisce una buona scalabilità, cioè lo speedup in fase di esecuzione aumenta quasi linearmente all'aumentare del numero di processori impiegati nel calcolo.

Attualmente presso il CILEA è disponibile la versione seriale del prodotto sulla macchina SPP1200/XA a 32 processori. Inoltre è disponibile Spectrum Visualizer prodotto per la visualizzazione in forma grafica dei risultati delle simulazioni.

Modalità di utilizzo

Come detto precedentemente Spectrum è installato sulla macchina Exemplar SPP1200/XA. Per poter utilizzare il prodotto occorre configurare il proprio ambiente di lavoro in maniera opportuna; si consiglia, a tale scopo, di copiare il file:

```
/mcae/spectrum/conf/centricrc
```

nella propria directory di lavoro, e poi dare il comando:

```
source ./centricrc
```

Per ora è disponibile agli utenti solo la versione sequenziale del prodotto. Per poter lanciare il programma si devono dare i seguenti comandi:

Per utilizzare l'interfaccia grafica:

```
solvergi1v10
```

Per usare il programma in modalità line_mode:

```
solversh1v10
```

Per utilizzare il visualizzatore:

```
visg1v10
```

3. FLOW 3D

FLOW3D è prodotto da CFDS, divisione della AEA, agenzia britannica per le energie alternative.

FLOW3D è un codice ai volumi finiti che permette di eseguire simulazioni del moto di fluidi in regime incomprimibile, laminare o turbolento. La versione disponibile attualmente è la 3.3 e risale al 1994.

FLOW3D risolve diverse classi di problemi tipici della CFD mediante il metodo dei volumi finiti.

Il metodo delle differenze finite, e la sua generalizzazione in tre dimensioni, prevede la divisione del dominio di calcolo in sottoregioni, celle, cubiche, in cui vengono integrate le equazioni differenziali alle derivate parziali che descrivono fisicamente i fenomeni d'interesse. FLOW3D permette l'utilizzo di griglie di calcolo multi-block non strutturate. I singoli blocchi sono strutturati e vengono 'incollati' in modo da descrivere completamente il volume di calcolo.

Classi di problemi modellizzabili

Flussi mono e plurifase

Multi-Fluid model

Homogeneous model

Flussi di miscele di gas

Flussi in regime comprimibile a numero di Mach arbitrario

Problemi di combustione:

Eddy-Break-Up model

Mixed-Is-Burnt model

Combustione di olii

Produzione di NOx

Problemi di cinetica chimica

Problemi di trasporto di particelle solide:

spray model

coal combustion model

trasporto di calore e massa

Modelli di materiali:

- Fluidi newtoniani e non

Modelli di turbolenza:

- K-epsilon
- Prandtl mixing lenght
- RNG K-epsilon

Algoritmi numerici

- Schemi alle differenze finite:
 - TVD/MUSCL
 - QUICK

Modalità di utilizzo

Il prodotto consiste in tre moduli fondamentali: il preprocessore SOPHIA, il visualizzatore JASPER e il solutore FLOW3D.

I primi due sono installati sulla macchina Exemplar 1200 XA, il terzo sulla macchina vettoriale CONVEX C3820.

In ambiente Exemplar occorre copiare i files:

```
/users/miglioli/.cshrc_flow3d  
/users/miglioli/.login_flow3d
```

nella propria home directory e sostituirli ai files .cshrc e .login; ogni volta che si apre una nuova sessione risulta così configurato l'ambiente di lavoro. Il comando:

enviro

serve per mandare in esecuzione l'interfaccia grafica verso i vari moduli del programma.

Una volta definita la griglia di calcolo, per passare alla fase di soluzione del problema numerico, occorre spostare i file generati in ambiente Convex C3820; per poter configurare il proprio ambiente di lavoro occorre copiare il file:

```
/mcae/flow3d3.3/setup
```

nella propria home directory ed eseguirlo.

Il solutore potrà essere lanciato con il comando:

```
runf3d -fc <nome_file_di_comandi> -geom  
<nome_file_di_geometria>
```

4. KIVA 3

KIVA è un programma per la simulazione del moto di fluidi chimicamente reattivi, in particolar modo nei motori a combustione interna, in grado di trattare anche la dinamica degli spray liquidi in evaporazione. KIVA è stato prodotto dal Los Alamos National Laboratory, New Mexico.

La formulazione utilizzata è completamente tridimensionale, ma è possibile trattare anche problemi planari o assialsimmetrici. KIVA è un programma time-marching alle differenze finite, in cui le differenze nello spazio vengono formate rispetto ad una griglia di calcolo tridimensionale generalizzata di esaedri

arbitrari i cui vertici hanno coordinate geometriche che sono funzioni del tempo. Questa caratteristica permette una descrizione dei problemi lagrangiana, euleriana o mista, consentendo, così, di trattare facilmente contorni curvi o mobili. E' disponibile un modello di turbolenza a scala minore della risoluzione della griglia di calcolo che include il trasporto di energia cinetica turbolenta; inoltre lo strato limite turbolento in prossimità delle pareti solide è opportunamente modellizzabile. Infine è possibile trattare un numero arbitrario di specie e reazioni chimiche utilizzando diversi algoritmi, mentre il programma è in grado di rappresentare, mediante tecniche di tipo lagrangiano, spray liquidi in evaporazione, comprendendo gli effetti di coalescenza e collisione tra le particelle.

Attualmente è in corso il porting del programma sulla macchina SPP1200/XA del CILEA, e, in futuro, si intende produrre la versione parallela del programma, per metterlo a disposizione degli utenti sia accademici che industriali che ne facciano esplicita richiesta.